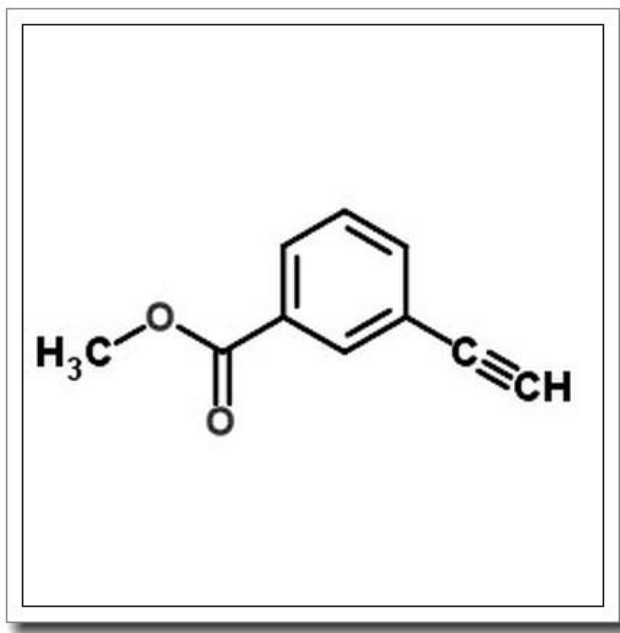


3-乙炔基苯甲酸甲酯

Methyl 3-ethynylbenzoate



产品基本信息

属性	值
化学名称	Methyl 3-ethynylbenzoate
中文名称	3-乙炔基苯甲酸甲酯
CAS 号	10602-06-9
分子式	C ₁₀ H ₈ O ₂
分子量	160.169
纯度	>96%

产品说明

3-乙炔基苯甲酸甲酯产品说明

1. 产品概述与化学特性

3-乙炔基苯甲酸甲酯 (Methyl 3-ethynylbenzoate, CAS 号: 10602-06-9) 是一种芳香族酯类化合物, 分子式为 $C_{10}H_8O_2$, 分子量为 160.169。该化合物由苯甲酸甲酯骨架与乙炔基官能团构成, 外观通常为无色至淡黄色液体或固体, 纯度高于 96%。其结构中的乙炔基和酯基使其具有较高的反应活性, 适用于多种有机合成反应, 如点击化学 (Click Chemistry) 和交叉偶联反应。

2. 生物化学功能与重要性

3-乙炔基苯甲酸甲酯在生物化学领域的重要性主要体现在其作为中间体的功能。乙炔基团可与叠氮化物发生高效的 1,3-偶极环加成反应 (铜催化点击化学反应), 广泛应用于生物标记、蛋白质修饰和药物开发。此外, 其酯基可通过水解或转酯化反应进一步衍生化, 为构建复杂分子结构提供灵活的工具。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物在医药研发、材料科学和化学生物学中具有广泛用途。在医药领域, 它常用于合成靶向药物分子或荧光探针的前体; 在材料科学中, 可用于制备功能化聚合物或纳米材料; 在化学生物学中, 常用于标记生物分子 (如蛋白质、核酸) 以研究其相互作用。此外, 它还可作为有机合成中的关键砌块, 用于构建杂环化合物或天然产物类似物。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品密封保存于干燥、阴凉的环境中, 避免光照和潮湿, 储存温度以 $2-8^{\circ}C$ 为宜。使用时需在惰性气体 (如氮气) 保护下操作, 以防止乙炔基氧化或水解。实验人员应佩戴防护手套、护目镜, 并在通风橱中处理, 避免直接接触皮肤或吸入蒸气。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过高效液相色谱 (HPLC) 或气相色谱 (GC) 检测, 纯度均一性严格控制在

96%以上。安全信息方面, 该化合物可能对眼睛、皮肤和呼吸系统造成刺激, 操作时需遵守化学品通用防护规范。若不慎接触, 应立即用大量清水冲洗并就医。废弃物应按照有机溶剂处理标准进行回收或无害化处置。

本品为科研用途设计, 不适用于食品、药品或家庭用途。